



TITLE:

Theoretical Study on Carrier Transport in
Semiconductor Nanowires Based on
Atomistic Modeling(Abstract_要旨)

AUTHOR(S):

Tanaka, Hajime

CITATION:

Tanaka, Hajime. Theoretical Study on Carrier Transport in Semiconductor Nanowires
Based on Atomistic Modeling. 京都大学, 2017, 博士(工学)

ISSUE DATE:

2017-03-23

URL:

<https://doi.org/10.14989/doctor.k20381>

RIGHT:

学位規則第九第2項により要約公開

京都大学	博士（工学）	氏 名	田 中 一
論文題目	Theoretical Study on Carrier Transport in Semiconductor Nanowires Based on Atomistic Modeling (原子論的モデルに基づく半導体ナノワイヤにおけるキャリア輸送 の理論的研究)		
(論文内容の要旨)			
<p>本論文は、将来の大規模集積回路(LSI)における基本デバイスのチャネル構造として期待されるIV族半導体(Si, Ge)ナノワイヤのエネルギーバンド構造、移動度、ドリフト速度、およびナノワイヤをチャネルとするナノワイヤ・トランジスタ特性に関する理論的研究をまとめたもので、7章からなる。</p> <p>第1章では、Si LSIの進展と、その基本デバイスであるMOSFET（金属－酸化膜－半導体電界効果トランジスタ）の微細化に伴って顕在化する問題点を整理した後、極限的な微細MOSFETとして有望なSiおよびGeナノワイヤMOSFETの特徴について概説している。次に、当該分野の先行研究を紹介しながら半導体ナノワイヤにおける量子閉じ込め効果に起因する電子状態の変化、ナノワイヤ中のキャリア輸送現象の理解の困難さを述べ、本研究の位置付けと目的を明らかにしている。</p> <p>第2章では、半導体ナノワイヤにおけるキャリア輸送を論じる上で重要な伝導帯および価電子帯の量子閉じ込め効果を理解するために、強束縛近似法を用いて様々な構造（断面形状、結晶方位）のナノワイヤのバンド構造と有効質量を明らかにしている。さらに、微細構造における格子振動を解析するモデルを用いてナノワイヤのフォノン分散を計算し、ボルツマン輸送方程式とフェルミの黄金律を用いてフォノン制限キャリア移動度(低電界)を計算し、そのナノワイヤ形状および方位依存性を明らかにしている。低電界移動度が、キャリア分布で重み付け平均した平均有効質量、ナノワイヤの断面積、およびエネルギーバンドの状態密度で統一的に理解できることを示している。また、ナノワイヤ表面における境界条件がフォノン分散に及ぼす影響を調べ、自由端と設定する境界条件が適切であることを論じている。</p> <p>第3章では、ナノワイヤで特に問題となる微小な表面ラフネスがキャリア輸送に及ぼす影響を定量的に解析している。ラフネス散乱を記述するために、ナノワイヤ側壁の微小な変位による摂動項を考慮して電子－フォノン相互作用ハミルトニアンを導出し、これを独自のプログラムに取り込むことによって、フォノン散乱に加えてラフネス散乱も考慮した移動度の計算を可能にしている。ラフネス散乱がキャリアの低電界移動度に及ぼす影響を定量的に明らかにし、ナノワイヤの断面形状や結晶方位によってラフネス散乱の影響が大きく異なることを見出している。ラフネス散乱の影響が大きいナノワイヤと小さいナノワイヤの違いをエネルギーバンド構造と有効質量の違いで統一的に説明できることを提示している。また、第2, 3章の結果を総合して、高いキャリア移動度が期待できるナノワイヤ構造を提唱している。特に、フォノン制限移動度の高いナノワイヤは、ラフネス散乱の影響を受けにくいことを見出したことは応用の観点でも意義深い。</p>			

京都大学	博士（工学）	氏 名	田中 一
<p>第4章では、ナノワイヤに高電界を印加した時のキャリアのドリフト速度を、ボルツマン輸送方程式を用いて解析した結果について述べている。高電界におけるキャリア分布関数の変化を正確に求めるために、ボルツマン輸送方程式の二次の項を含む非線形方程式を連続的に解き、高電界におけるキャリアのドリフト速度の電界強度依存性を明らかにしている。多くのナノワイヤ形状において高電界領域でドリフト速度が減少するという負性微分移動度が現れることを見出している。正孔で負性微分移動度が発現することを示したのは初めてであり、半導体物理の観点で意義が高い。また、これらの負性微分移動度を分布関数で重み付けした平均有効質量を用いて説明している。さらに、SiとGeナノワイヤにおけるドリフト速度の挙動の違いを明らかにし、Siの方がキャリアのエネルギー緩和が速いことで説明できることを示している。</p> <p>第5章では、短チャネル極限と位置づけられる無散乱のバリスティック（弾道的）輸送を考え、Top-of-the-Barrierモデルを用いてナノワイヤ中のバリスティック伝導を解析している。特にpチャネルGeトランジスタに着目して、その電気的特性を計算した結果を述べている。バリスティック輸送の場合は、低電界移動度ではなくソース端におけるキャリアの注入速度とバンドの状態密度（キャリア密度）により、トランジスタの電流が決まることを明らかにしている。この結果、高い低電界移動度を有するナノワイヤ構造が、必ずしも高いバリスティック電流を示さないことを指摘している。</p> <p>第6章では、キャリア散乱を考慮した現実的な準バリスティック輸送の計算に取り組み、独自のモデルを構築してSi、Geトランジスタの特性を計算した結果を述べている。まずナノワイヤチャネル内のポテンシャル分布を現実的な形状に固定し、SiおよびGeナノワイヤのキャリア輸送を比較し、Geの方がキャリアの平均自由行程が長いものの、エネルギー緩和が遅いために散乱によりキャリアがソース側に逆流しやすく、期待するほどの性能向上に繋がらないことを指摘している。次に、ナノワイヤチャネル内のポテンシャル分布も自己無撞着に計算し、現実的なナノワイヤMOSFETの特性を予測している。5章で述べたバリスティック輸送の場合に比べて、散乱によるオン電流の減少とトンネル効果によるオフ電流（リーク電流）の増大が生じることを示している。最後に、様々な構造（断面形状、結晶方位）のナノワイヤMOSFETの特性を詳細に解析し、長方形断面を有するGe[110]ナノワイヤMOSFETが最も有望であることを提唱している。</p> <p>第7章は結論であり、本研究を通じて得られたSi、Geナノワイヤにおけるキャリアの低電界移動度、ラフネス散乱の影響、高電界ドリフト速度に関する負性微分移動度、ナノワイヤにおけるバリスティックおよび準バリスティック輸送、ナノワイヤをチャネルとしたMOSFETの電気的特性予測などの成果を整理し、各々についてその物理的解釈を述べている。また、当該分野における今後の研究課題を提示し、これらの課題解決に向けた研究指針を提案している。</p>			

氏 名	田 中 一
-----	-------

(論文審査の結果の要旨)

本論文は、将来の大規模集積回路(LSI)における基本デバイスとして期待されるIV族半導体ナノワイヤにおけるエネルギーバンド構造、キャリア輸送とナノワイヤ・トランジスタ特性に関する理論的研究をまとめたもので、得られた主な成果は以下の通りである。

1. 原子論的アプローチによりSi, Geナノワイヤの伝導帯および価電子帯のエネルギーバンド構造とフォノン分散を計算し、これを基にしてSi, Geナノワイヤにおけるフォノン制限キャリア移動度を算出して、そのナノワイヤ形状および方位依存性を明らかにした。
2. ナノワイヤで特に問題となる微小な表面ラフネスがキャリア輸送に及ぼす影響に着目して、ラフネス散乱を記述する独自の物理モデルを提案し、ラフネス散乱が移動度に及ぼす影響を定量的に明らかにした。また、ラフネス散乱の影響が大きいナノワイヤと小さいナノワイヤの違いをエネルギーバンド構造と有効質量の違いで統一的に説明できることを示した。
3. ナノワイヤに高電界を印加した時のキャリアのドリフト速度を、ボルツマン輸送方程式を用いて定量的に解析した。多くのナノワイヤ形状において負性微分移動度が現れることを見出し、これを分布関数で重み付けした平均有効質量を用いて説明できることを示した。
4. 短チャネル極限と位置づけられるバリスティック輸送を考え、特にpチャネルGeナノワイヤ・トランジスタに着目して、その電氣的特性を明らかにした。バリスティック輸送の場合は、移動度ではなくキャリアの注入速度とバンドの状態密度により、トランジスタの電流が決まることを明らかにした。
5. キャリア散乱を考慮した現実的な準バリスティック輸送の計算に取り組み、独自のモデルを構築してSi, Geナノワイヤ・トランジスタの特性を明らかにした。準バリスティック輸送の場合には、チャネル内のエネルギー緩和速度がトランジスタ特性に大きく影響することを示すとともに、本研究を総合して将来の高性能トランジスタの開発に望ましいナノワイヤ構造を提唱した。

以上、要するに、SiおよびGeナノワイヤにおける低電界移動度、高電界におけるドリフト速度、ナノワイヤをチャネルとするトランジスタ特性を独自の原子論的モデルにより明らかにし、将来のデバイス開発に適するナノワイヤ構造を提唱したもので、学術上、實際上寄与するところが少なくない。よって、本論文は博士(工学)の学位論文として価値あるものと認める。また、平成29年2月22日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行って、申請者が博士後期課程学位取得基準を満たしていることを確認し、合格と認めた。